

Název práce: Výpočty pomocí explicitně korelované multireferenční metody spřažených klastrů

Autor: Matej Švaňa

Katedra: Katedra fyzikální a makromolekulární chemie

Vedoucí bakalářské práce: Mgr. Jiří Pittner, Dr. rer. nat., Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR

Abstrakt: Celkové energie singletového stavu karbenu byly napočítány pomocí post-HF metod CCSD, CCSD-F12, MR BWCCSD, a MR BWCCSD-F12. Hlavním cílem práce bylo porovnat závislost konvergence celkové energie na kardinálním číslu použitých bází pro konvenční metodu MR BWCCSD a explicitně korelovanou metodu MR BWCCSD-F12. Byly prostudovány váhy jednotlivých referencí týkající se výpočtů multireferenčních metod. Výsledky ukázali, že použití explicitní korelace v multireferenčních metodách, stejně jako v jednoreferenčních metodách, urychluje konvergenci energie o jedno kardinální číslo báze.

Klíčová slova: spřažené klastry, multireferenční, explicitně korelované, F12, karben